



FLUIDUMOK TERMODINAMIKAI PARAMÉTEREINEK PREDIKCIÓJA ELVÁLASZTÁSI MŰVELETEKHEZ

A vegyipar fontos elválasztási művelete: a desztillálás és extrakció. A desztilláció hatékonysága attól függ, hogy a folyadékelegy összetétele mennyire tér el a vele egyensúlyban levő gőz összetételétől. Desztillációs eljárások tervezése csak a gőz-folyadék egyensúly ismeretében tehető meg. Folyadékok és oldatok termodinamikai tulajdonságait prediktáljuk COSMO-RS módszerrel robusztus kvantumkémiai számítások alapján, így lehetőség van olyan rendszerek vizsgálatára melyre az empirikus modellek (pl. UNIFAC) nem paraméterezettek vagy az már nem megfelelő pontosságú.

A MÓDSZERREL AZ ALÁBBI TULAJDONSÁGOK ELŐRE JELEZHETŐK

- Oldhatóság
- Megoszlási együtthatók ($\log P$, $\log K_{ow}$)
- pK_a értékek
- Aktivitási együtthatók, oldódási energiák, Henry állandó, többlet energiák
- Forráspont
- Lobbanáspontok

A MÓDSZER ALKALMAS

- Desztilláló tervezéséhez szükséges két- és háromkomponensű gőz-folyadék diagram (VLE/LLE) előállítására
- Összetételgörbék, oldhatósági rések meghatározására
- Folyadék-folyadék extrakció és optimális oldhatóság és meghatározására



SZOLGÁLTATÁSOK



ESZKÖZÖK

- Többkomponensű rendszerek termodinamikai paramétereinek nagy pontosságú előrejelzése

- Gaussian szoftvercsomag
- AMS szoftvercsomag
- Dalton szoftvercsomag
- ORCA szoftver